Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана
Факультет «Информатика и системы управления»
Кафедра «Автоматизированные системы обработки информации и управления»

Отчет
по лабораторной работе №4

«Подготовка обучающей и тестовой выборки, кросс-валидация и подбор гиперпараметров на примере метода ближайших соседей»

по курсу «Технологии машинного обучения»

ИСПОЛНИТЕЛЬ:

Голубкова С.В.
Группа РТ5-61Б

____

ПРЕПОДАВАТЕЛЬ:

Гапанюк Ю.Е.

____

Москва 2020

Лабораторная работа № 4

1. Цель лабораторной работы

Изучение сложных способов подготовки выборки и подбора гиперпараметров на примере метода ближайших соседей.

2. Задание

1. Выберите набор данных (датасет) для решения задачи классификации или регрессии.

2. С использованием метода train_test_split разделите выборку на обучающую и тестовую.

3. Обучите модель ближайших соседей для произвольно заданного гиперпараметра K. Оцените качество модели с помощью подходящих для задачи метрик.

4. Постройте модель и оцените качество модели с использованием кросс-валидации.

5. Произведите подбор гиперпараметра K с использованием GridSearchCV и кросс-валидации.

3. Выполнение работы

Лабораторная работа №4 по крусу ТМО

"Подготовка обучающей и тестовой выборки, кросс-валидация и подбор гиперпараметров на примере метода ближайших соседей".

In [2]:
```
import numpy as np
import pandas as pd
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.neighbors import KNeighborsRegressor, KNeighborsClassifier
from sklearn.model_selection import cross_val_score, cross_validate
from sklearn.model_selection import KFold, RepeatedKFold, LeaveOneOut, LeavePOut, ShuffleSplit, StratifiedKFold
from sklearn.metrics import accuracy_score, balanced_accuracy_score
from sklearn.metrics import precision_score, recall_score, f1_score, classification_report
from sklearn.metrics import confusion_matrix
from sklearn.metrics import mean_absolute_error, mean_squared_error, mean_squared_log_error, median_absolute_error, r2_score
from sklearn.metrics import roc_curve, roc_auc_score
from sklearn.model_selection import GridSearchCV
from sklearn.model_selection import learning_curve, validation_curve
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
import seaborn as sns
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline
sns.set(style="ticks")
```

1. Загрузка и первичный анализ данных

Выбран набор данных Болезни сердца UCI.

In [3]:
```
data = pd.read_csv('../datasets/heart.csv', sep=',')
data.head()
```

Out[3]:

	age	sex	cp	trestbps	chol	fbs	restecg	thalach	exang	oldpeak	slope	ca	thal	target
0	63	1	3	145	233	1	0	150	0	2.3	0	0	1	1
1	37	1	2	130	250	0	1	187	0	3.5	0	0	2	1
2	41	0	1	130	204	0	0	172	0	1.4	2	0	2	1
3	56	1	1	120	236	0	1	178	0	0.8	2	0	2	1
4	57	0	0	120	354	0	1	163	1	0.6	2	0	2	1

In [4]:
```
data.shape
```

Out[4]:
```
(303, 14)
```

Пропущенных значений нет:

In [5]:
```
data.isnull().sum()
```

Out[5]:
```
age         0
sex         0
cp          0
trestbps    0
chol        0
fbs         0
restecg     0
thalach     0
exang       0
oldpeak     0
slope       0
ca          0
thal        0
target      0
dtype: int64
```

Корреляционный анализ:

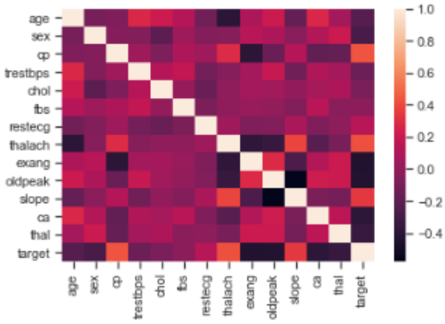
In [6]:
```
data.corr()
```

Out[6]:

	age	sex	cp	trestbps	chol	fbs	restecg	thalach	exang	oldpeak	slope	ca	thal	targe
age	1.000000	-0.098447	-0.068653	0.279351	0.213678	0.121308	-0.116211	-0.398522	0.096801	0.210013	-0.168814	0.276326	0.068001	-0.22543
sex	-0.098447	1.000000	-0.049353	-0.056769	-0.197912	0.045032	-0.058196	-0.044020	0.141664	0.096093	-0.030711	0.118261	0.210041	-0.28093
cp	-0.068653	-0.049353	1.000000	0.047608	-0.076904	0.094444	0.044421	0.295762	-0.394280	-0.149230	0.119717	-0.181053	-0.161736	0.43379
trestbps	0.279351	-0.056769	0.047608	1.000000	0.123174	0.177531	-0.114103	-0.046698	0.067616	0.193216	-0.121475	0.101389	0.062210	-0.14493
chol	0.213678	-0.197912	-0.076904	0.123174	1.000000	0.013294	-0.151040	-0.009940	0.067023	0.053952	-0.004038	0.070511	0.098803	-0.08523
fbs	0.121308	0.045032	0.094444	0.177531	0.013294	1.000000	-0.084189	-0.008567	0.025665	0.005747	-0.059894	0.137979	-0.032019	-0.02804
restecg	-0.116211	-0.058196	0.044421	-0.114103	-0.151040	-0.084189	1.000000	0.044123	-0.070733	-0.058770	0.093045	-0.072042	-0.011981	0.13723
thalach	-0.398522	-0.044020	0.295762	-0.046698	-0.009940	-0.008567	0.044123	1.000000	-0.378812	-0.344187	0.386784	-0.213177	-0.096439	0.42174
exang	0.096801	0.141664	-0.394280	0.067616	0.067023	0.025665	-0.070733	-0.378812	1.000000	0.288223	-0.257748	0.115739	0.206754	-0.43675
oldpeak	0.210013	0.096093	-0.149230	0.193216	0.053952	0.005747	-0.058770	-0.344187	0.288223	1.000000	-0.577537	0.222682	0.210244	-0.43069
slope	-0.168814	-0.030711	0.119717	-0.121475	-0.004038	-0.059894	0.093045	0.386784	-0.257748	-0.577537	1.000000	-0.080155	-0.104764	0.34587
ca	0.276326	0.118261	-0.181053	0.101389	0.070511	0.137979	-0.072042	-0.213177	0.115739	0.222682	-0.080155	1.000000	0.151832	-0.39172
thal	0.068001	0.210041	-0.161736	0.062210	0.098803	-0.032019	-0.011981	-0.096439	0.206754	0.210244	-0.104764	0.151832	1.000000	-0.34402
target	-0.225439	-0.280937	0.433798	-0.144931	-0.085239	-0.028046	0.137230	0.421741	-0.436757	-0.430696	0.345877	-0.391724	-0.344029	1.00000

In [7]:
```
sns.heatmap(data.corr())
```

Out[7]: <matplotlib.axes._subplots.AxesSubplot at 0xdd23c10>



Основываясь на корреляционном анализе, можно сделать вывод:

- Целевой признак больше всего коррелирует с "cp", "exang", "oldpeak" и "ca". Их точно нужно оставить в модели.

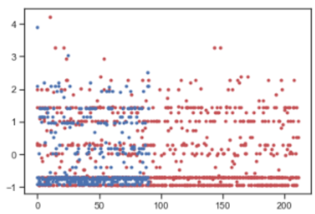
2. Разделение выборки на обучающую и тестовую

In [119]:
```
# выбор нужных столбцов
X = data[['cp','exang','oldpeak', 'ca']]
y = data.target
heart_X_train, heart_X_test, heart_y_train, heart_y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.3, random_state=1)
```

In [120]:
```
# нормализация столбцов X
sc = StandardScaler()
heart_X_train = sc.fit_transform(heart_X_train)
heart_X_test = sc.fit_transform(heart_X_test)
heart_X_train
```

Out[120]:
```
array([[ 1.99223435,  1.43960542,  0.35630932,  0.29558577],
       [-0.94758246, -0.69463478, -0.93178576,  0.29558577],
       [-0.94758246,  1.43960542,  1.09236365,  0.29558577],
       [ 1.99223435, -0.69463478, -0.10372464, -0.6990838 ],
       [-0.94758246,  1.43960542, -0.19573143, -0.6990838 ],
       [ 1.01229541, -0.69463478,  1.09236365,  0.29558577],
       [-0.94758246,  1.43960542, -0.83977897,  0.29558577],
       [ 1.99223435, -0.69463478,  0.72433649,  1.29025534],
       [ 1.99223435, -0.69463478, -0.01171785, -0.6990838 ],
       [-0.94758246,  1.43960542, -0.93178576, -0.6990838 ],
       [-0.94758246,  1.43960542,  4.22059457, -0.6990838 ],
       [ 0.03235647, -0.69463478,  0.72433649, -0.6990838 ],
       [ 1.01229541, -0.69463478, -0.93178576, -0.6990838 ],
       [-0.94758246,  1.43960542,  1.92042478, -0.6990838 ],
       [ 0.03235647, -0.69463478, -0.5637586 ,  3.27959448],
       [ 0.03235647, -0.69463478, -0.01171785, -0.6990838 ],
       [-0.94758246,  1.43960542,  0.90835007,  1.29025534],
       [ 0.03235647, -0.69463478, -0.74777218, -0.6990838 ],
       [ 1.01229541,  1.43960542, -0.37974501, -0.6990838 ],
       [ 1.99223435, -0.69463478, -0.19573143,  1.29025534],
```

In [121]:
```
# визуализация выборки
plt.plot(heart_X_train,'r.', \
         heart_X_test, 'b.')
plt.show()
```



3. Обучение модели ближайших соседей для произвольно заданного гиперпараметра K. Оценка качества модели с помощью подходящих для задачи метрик.

In [122]:
```
# Первичное обучение модели и оценка качества
# 50 ближайших соседей - недообучение
cl1_1 = KNeighborsClassifier(n_neighbors=50)
cl1_1.fit(heart_X_train, heart_y_train)
target1_0 = cl1_1.predict(heart_X_train)
target1_1 = cl1_1.predict(heart_X_test)
accuracy_score(heart_y_train, target1_0), accuracy_score(heart_y_test, target1_1)
```

Out[122]:
```
(0.8113207547169812, 0.7032967032967034)
```

In [142]:
```
# 24 ближайших соседа (приближаемся к балансу между смещением и дисперсией)
cl1_2 = KNeighborsClassifier(n_neighbors=24)
cl1_2.fit(heart_X_train, heart_y_train)
target1_0 = cl1_2.predict(heart_X_train)
target1_1 = cl1_2.predict(heart_X_test)
accuracy_score(heart_y_train, target1_0), accuracy_score(heart_y_test, target1_1)
```

Out[142]:
```
(0.8160377358490566, 0.7582417582417582)
```

In [143]:
```
# 1 ближайший сосед - переобучение
cl1_3 = KNeighborsClassifier(n_neighbors=1)
cl1_3.fit(heart_X_train, heart_y_train)
target1_0 = cl1_3.predict(heart_X_train)
target1_1 = cl1_3.predict(heart_X_test)
accuracy_score(heart_y_train, target1_0), accuracy_score(heart_y_test, target1_1)
```

Out[143]:
```
(0.9575471698113207, 0.6923076923076923)
```

4. Построение модели и оценка качества модели с использованием кросс-валидации.

In [144]:
```
scores = cross_val_score(KNeighborsClassifier(n_neighbors=10),
                         X, y,
                         cv=LeaveOneOut())
scores, np.mean(scores)
```

Out[144]:
```
(array([1., 0., 1., 1., 0., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1.,
        1., 1., 0., 1., 1., 1., 1., 1., 0., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1.,
        1., 1., 1., 1., 1., 1., 0., 1., 0., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1.,
        1., 0., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 0., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1.,
        1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1.,
        1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 0., 1., 1., 1., 0., 1., 1., 1., 0.,
        0., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1.,
        1., 0., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 0., 1., 1., 1., 1., 1., 1.,
        1., 1., 0., 0., 1., 1., 1., 0., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 0., 1., 1.,
        1., 1., 1., 1., 1., 0., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1.,
        0., 0., 0., 1., 1., 1., 1., 0., 1., 1., 1., 1., 0., 1., 1., 1., 1.,
        1., 0., 0., 1., 1., 1., 1., 0., 1., 0., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 0.,
        1., 1., 1., 1., 1., 1., 0., 1., 0., 1., 1., 1., 0., 1., 1., 1., 1.,
        1., 0., 1., 1., 1., 0., 1., 0., 0., 0., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1.,
        1., 0., 1., 0., 1., 1., 1., 0., 1., 1., 0., 1., 1., 1., 1., 1., 0.,
        1., 1., 1., 1., 0., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 1., 0., 1., 1., 0., 1.,
        0., 1., 1., 1., 1., 0., 1., 1., 1., 1., 0., 0., 1., 1., 0., 0., 1.,
        1., 1., 1., 1., 0., 1., 1., 0., 1., 0., 0., 1., 1., 0.]),
 0.8151815181518152)
```

In [145]:
```
# использование метрики f1
scores = cross_val_score(KNeighborsClassifier(n_neighbors=10),
                         X, y, cv=3,
                         scoring='f1_weighted')
scores, np.mean(scores)
```

Out[145]:
```
(array([0.82017436, 0.81202965, 0.80019373]), 0.8107992468636055)
```

Использование метода cross_validate:

In [146]:
```
scoring = {'precision': 'precision_weighted',
           'recall': 'recall_weighted',
           'f1': 'f1_weighted'}
```

In [147]:
```
scores = cross_validate(KNeighborsClassifier(n_neighbors=2),
                        X, y, scoring=scoring,
                        cv=3, return_train_score=True)
scores
```

Out[147]:
```
{'fit_time': array([0.00300622, 0.00299311, 0.00299215]),
 'score_time': array([0.00896335, 0.00897408, 0.00797868]),
 'test_precision': array([0.69609461, 0.74440183, 0.81166902]),
 'train_precision': array([0.87622058, 0.89776878, 0.86876427]),
 'test_recall': array([0.68316832, 0.73267327, 0.81188119]),
 'train_recall': array([0.86633663, 0.89108911, 0.85643564]),
 'test_f1': array([0.6828577 , 0.73267327, 0.81169495]),
 'train_f1': array([0.86648407, 0.89128146, 0.85649546])}
```

5. Подбор гиперпараметра K с использованием GridSearchCV и кросс-валидации.

In [148]:
```
n_range = np.array(range(5,55,5))
tuned_parameters = [{'n_neighbors': n_range}]
tuned_parameters
```

Out[148]:
```
[{'n_neighbors': array([ 5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50])}]
```

In [149]:
```
%%time
clf_gs = GridSearchCV(KNeighborsClassifier(), tuned_parameters, cv=5, scoring='accuracy')
clf_gs.fit(heart_X_train, heart_y_train)
```

```
Wall time: 215 ms
```

Out[149]:
```
GridSearchCV(cv=5, error_score=nan,
             estimator=KNeighborsClassifier(algorithm='auto', leaf_size=30,
                                            metric='minkowski',
                                            metric_params=None, n_jobs=None,
                                            n_neighbors=5, p=2,
                                            weights='uniform'),
             iid='deprecated', n_jobs=None,
             param_grid=[{'n_neighbors': array([ 5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50])}],
             pre_dispatch='2*n_jobs', refit=True, return_train_score=False,
             scoring='accuracy', verbose=0)
```

In [150]:
```
clf_gs.cv_results_
```

Out[150]:
```
{'mean_fit_time': array([0.00139742, 0.0009963 , 0.0009975 , 0.00080819, 0.        ,
        0.        , 0.        , 0.002     , 0.        , 0.00400009]),
 'std_fit_time': array([4.90234921e-04, 1.29186794e-06, 1.78416128e-07, 4.04556255e-04,
        0.00000000e+00, 0.00000000e+00, 0.00000000e+00, 3.99999619e-03,
        0.00000000e+00, 4.89909164e-03]),
 'mean_score_time': array([0.00299039, 0.00363545, 0.00239348, 0.00119653, 0.00400009,
        0.00199528, 0.0036129 , 0.00199966, 0.0039947 , 0.00200391]),
 'std_score_time': array([0.00063076, 0.0007755 , 0.00048832, 0.00097696, 0.00489909,
        0.00399055, 0.00446978, 0.00399933, 0.0048925 , 0.00400782]),
 'param_n_neighbors': masked_array(data=[5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50],
              mask=[False, False, False, False, False, False, False, False,
                    False, False],
        fill_value='?',
             dtype=object),
 'params': [{'n_neighbors': 5},
  {'n_neighbors': 10},
  {'n_neighbors': 15},
  {'n_neighbors': 20},
  {'n_neighbors': 25},
  {'n_neighbors': 30},
  {'n_neighbors': 35},
  {'n_neighbors': 40},
  {'n_neighbors': 45},
  {'n_neighbors': 50}],
 'split0_test_score': array([0.79069767, 0.72093023, 0.65116279, 0.69767442, 0.69767442,
        0.62790698, 0.62790698, 0.65116279, 0.72093023, 0.72093023]),
 'split1_test_score': array([0.79069767, 0.8372093 , 0.86046512, 0.86046512, 0.86046512,
        0.8372093 , 0.8372093 , 0.8372093 , 0.8372093 , 0.8372093 ]),
 'split2_test_score': array([0.83333333, 0.78571429, 0.76190476, 0.76190476, 0.73809524,
        0.73809524, 0.76190476, 0.78571429, 0.78571429, 0.78571429]),
 'split3_test_score': array([0.9047619 , 0.9047619 , 0.9047619 , 0.88095238, 0.9047619 ,
        0.88095238, 0.9047619 , 0.9047619 , 0.9047619 , 0.88095238]),
 'split4_test_score': array([0.83333333, 0.83333333, 0.85714286, 0.83333333, 0.88095238,
        0.88095238, 0.88095238, 0.88095238, 0.83333333, 0.85714286]),
 'mean_test_score': array([0.83056478, 0.81638981, 0.80708749, 0.806866  , 0.81638981,
        0.79302326, 0.80254707, 0.81196013, 0.81638981, 0.81638981]),
 'std_test_score': array([0.04171167, 0.06096504, 0.0908284 , 0.06783287, 0.08263652,
        0.09766877, 0.09994768, 0.09006026, 0.06096504, 0.05712461]),
 'rank_test_score': array([ 1,  2,  7,  8,  2, 10,  9,  6,  2,  2], dtype=int32)}
```

In [151]:
```
# Лучшая модель
clf_gs.best_estimator_
```

Out[151]:
```
KNeighborsClassifier(algorithm='auto', leaf_size=30, metric='minkowski',
                     metric_params=None, n_jobs=None, n_neighbors=5, p=2,
                     weights='uniform')
```

In [152]:
```
# Лучшее значение метрики
clf_gs.best_score_
```

Out[152]:
```
0.8305647840531561
```


In [152]:
```
# Лучшее значение метрики
clf_gs.best_score_
```

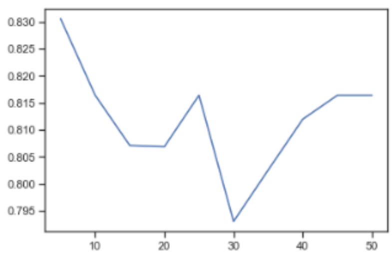
Out[152]:
```
0.8305647840531561
```


In [153]:
```
# Лучшее значение параметров
clf_gs.best_params_
```

Out[153]:
```
{'n_neighbors': 5}
```

In [154]:
```
# Изменение качества на тестовой выборке в зависимости от K-соседей
plt.plot(n_range, clf_gs.cv_results_['mean_test_score'])
```

Out[154]:
```
[&lt;matplotlib.lines.Line2D at 0x4fae8b0&gt;]
```



6.Обучение модели и оценка качества с учетом подобранных гиперпараметров

In [155]:
```
clf_gs.best_estimator_.fit(heart_X_train, heart_y_train)
target2_0 = clf_gs.best_estimator_.predict(heart_X_train)
target2_1 = clf_gs.best_estimator_.predict(heart_X_test)
```

In [156]:
```
# Новое качество модели
accuracy_score(heart_y_train, target2_0), accuracy_score(heart_y_test, target2_1)
```

Out[156]:
```
(0.8537735849056604, 0.7142857142857143)
```

In [157]:
```
# Качество модели до подбора гиперпараметров
accuracy_score(heart_y_train, target1_0), accuracy_score(heart_y_test, target1_1)
```

Out[157]:
```
(0.9575471698113207, 0.6923076923076923)
```